

Title	有機分子性結晶の気体吸着特性の解析
Author(s)	津江, 広人
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2020), 2019: 58-58
Issue Date	2020-03
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/251138">http://hdl.handle.net/2433/251138</a>
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

有機分子性結晶の気体吸着特性の解析

Analysis of the gas sorption behavior of organic molecular crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座

津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端を保護した BocGly-L-Phe（以下、**1** と略記。図1）の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。

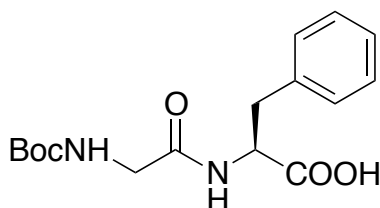


図1 **1** の分子構造

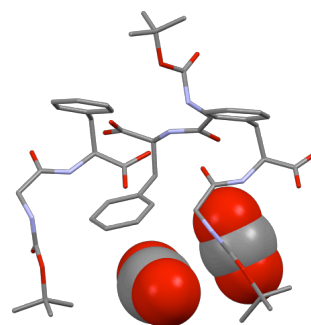


図2 **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態

本研究では、**1** の結晶が示す気体吸着特性を解明することを目的として、**1** が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行い、結晶を構成する**1**と結晶中に吸着された二酸化炭素との間に働く分子間相互作用の解析を行った。ここでは、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

単結晶X線構造解析の結果、**1** の結晶中に二酸化炭素が吸着された状態を原子レベルで可視化することに成功した(図2)。2分子の二酸化炭素の周辺には、計8分子の**1** が近接しており、これらの分子間相互作用によって、**1** の結晶中に二酸化炭素が吸着されていることが示唆された。そこで、計算化学アプリケーション Materials Studio の DMol<sup>3</sup>を用いて、二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の構造最適化を行った後、Gaussian 09を用いて二次の摂動法による *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い、**1**と二酸化炭素との間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果、分散力が、これらの間に働く分子間相互作用の主たるものであり、**1** による高選択的な二酸化炭素の吸着挙動は、同相互作用によって発現していることが明らかとなった。